

## Трехмерное моделирование течений в микроканалах с системой детерминированного бокового смещения методом граничных элементов

© А.З. Булатова, Д.М. Туйгунова, О.А. Солнышкина

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

E-mail: dianatgnv@gmail.com

Поступило в Редакцию 3 мая 2024 г.

В окончательной редакции 4 июля 2024 г.

Принято к публикации 30 октября 2024 г.

Микрофлюидные системы с детерминированным боковым смещением (DLD) являются одной из наиболее эффективных технологий для управления частицами в потоке. Исследовано влияние особенностей геометрии микроканалов с DLD на гидродинамические особенности течений жидкости. Численное моделирование проводилось для трехмерного случая с помощью метода граничных элементов, ускоренного быстрым методом мультиполей на гетерогенных вычислительных архитектурах. Изучено влияние формы структур DLD и смещения ряда на распределение скорости в канале и изменение градиента скорости между рядами структур и в зазорах между двумя соседними столбиками.

**Ключевые слова:** детерминированное боковое смещение, гидродинамика, течения Стокса, метод граничных элементов, микрофлюидные системы.

DOI: 10.61011/PJTF.2024.23.59398.6504k

Необходимость исследования потоков в микрофлюидных системах обусловлена широким разнообразием практических приложений и перспективных технологических возможностей. Такие системы используются для управления потоками жидкости, смешивания реагентов, разделения частиц и других процессов на микроуровне [1]. В биомедицинской диагностике с помощью микрофлюидных систем можно проводить анализ биомедицинских образцов клеток, белков, крови и других биологических жидкостей. Понимание течений в таких системах имеет важное значение для разработки новых методов диагностики, скрининга и терапии [2]. Микрофлюидные системы обладают рядом преимуществ. Благодаря своим размерам они позволяют создавать компактные устройства и чипы, что приводит к уменьшению размеров лабораторного оборудования. Из-за характерно малых размеров микроустройства требуют минимальное количество реагентов и образцов, что весьма эффективно при работе с дорогостоящими реагентами или ферментами. Микрофлюидные устройства обладают высоким пространственно-временным разрешением, что весьма полезно для изучения отдельных клеток. Автоматизация микрофлюидных систем упрощает процессы анализа и устраняет возможность человеческих ошибок, а портативность позволяет объединить несколько функций, таких как сепарация, микросмешивание, реакция и обнаружение, в одном устройстве [3].

Выделение и сортировка клеток из сложных, гетерогенных смесей являются одной из важнейших задач во многих областях биологии, биотехнологии и медицины. Существует ряд технологий для манипуляции частицами в микроканалах, которые можно условно разделить на активные (с использованием внешних физических по-

лей) и пассивные [4]. Пассивная технология опирается на такие свойства сортируемых частиц, как размер, плотность, форма и деформируемость, а также на геометрию микрофлюидного устройства и его гидродинамические характеристики. Одним из наиболее известных методов является технология детерминированного бокового смещения (DLD) [5], которая использует определенный порядок столбиков в канале для точного управления траекторией и разделения частиц. Каждый последующий ряд в таком канале смещен на определенное расстояние от предыдущего, что приводит к образованию нескольких линий потока в зазорах между столбиками. Эти линии потока разделены линиями застойного течения, которые начинаются и заканчиваются на столбиках (рис. 1). В зависимости от размера частицы либо перемещаются по определенному маршруту по зигзагообразной траектории, либо перемещаются на следующую линию потока каждый раз, когда она проходит через препятствие. Однако при сортировке деформируемых частиц возникают некоторые трудности использования технологии DLD, поскольку они могут деформироваться под действием сил и менять свой видимый размер. Для всех деформируемых частиц, таких как макромолекулы, капли и клетки, степень деформации зависит от вязких и инерционных сил, поэтому эффективность разделения меняется в зависимости от скорости потока [6]. Использование оптимизированных геометрий столбиков DLD уменьшает градиент скорости, предотвращает засорение микрофлюидного устройства и увеличивает эффективность сортировки [7]. Таким образом, целью данного исследования является изучение влияния особенностей геометрии микроканалов с детерминированным боковым смещением на параметры гидродинамических потоков.

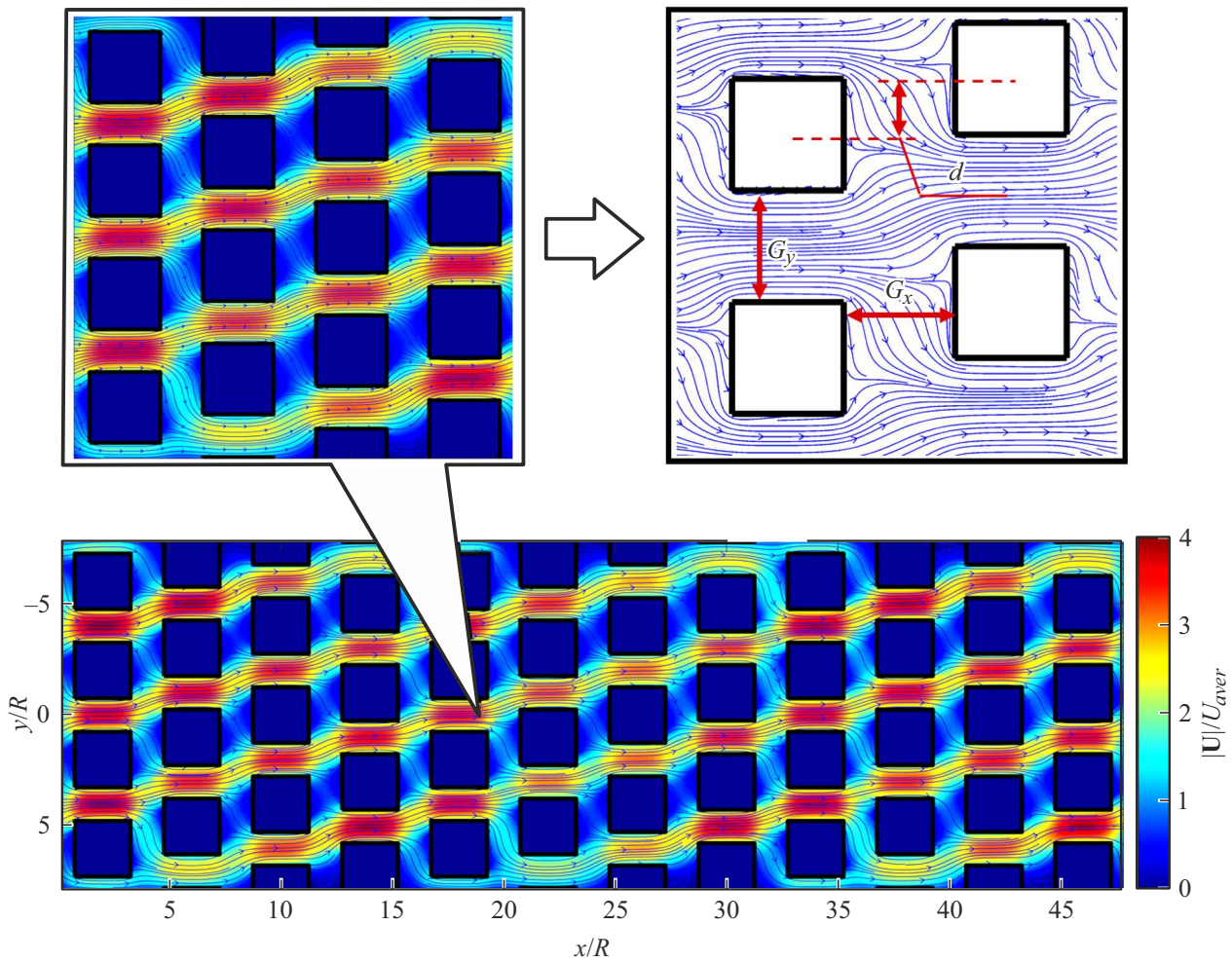


Рис. 1. Распределение модуля скорости  $|U|/U_{aver}$  и линии потока в микроканале с DLD при  $d = 10 \mu\text{m}$ .

Работа направлена на улучшение конструктивных характеристик микрофлюидных систем, что позволит повысить точность и эффективность процессов сортировки и разделения частиц.

В настоящей работе рассматривается установившееся периодическое течение вязкой несжимаемой жидкости в плоском микроканале с детерминированным боковым смещением элементов различной формы и смещения каждого последующего ряда относительно предыдущего. Предполагается, что течения достаточно медленные, поэтому инерционные силы незначительны по сравнению с вязкими силами. Таким образом, уравнения Навье–Стокса для несжимаемой жидкости упрощаются до уравнений Стокса и могут быть использованы для описания динамики рассматриваемой системы:

$$-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{U} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (1)$$

где  $\mathbf{U}$  — скорость,  $p$  — давление,  $\mu$  — вязкость. На боковой поверхности канала и на поверхности недеформируемых структур задается условие прилипания, а на входном и выходном сечениях канала задается условие

периодичности течения:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}|_{x=0} = \mathbf{U}|_{x=L} = \mathbf{U}_S, \quad \mathbf{f} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, \\ \mathbf{f}|_{x=L} = -\mathbf{f}|_{x=0} + \mathbf{f}_p, \quad \mathbf{f}_p = \mathbf{i}_x \Delta p, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}$  — тензор напряжений;  $\mathbf{n}$  — нормаль к поверхности;  $\Delta p$  — перепад давления;  $\mathbf{f}$  — вектор напряжений в жидкости;  $L$  — длина фрагмента расчетной области или длина периодичности по направлению  $x$ ;  $S$  — индекс входного сечения канала;  $p$  обозначает добавку к вектору напряжений, ассоциированную с заданным перепадом давления. Моделирование проводится с использованием разработанного ранее 3D-метода граничных элементов, ускоренного быстрым методом мультиполей на гетерогенных вычислительных архитектурах [8–10]. Корректность выбранной математической модели и численного подхода была подтверждена путем сравнения с аналитическим решением задачи о течении вязкой жидкости в плоском канале прямоугольной формы. Более детальное сравнение можно найти в работе [10].

Рассматривается течение в каналах с прямоугольным поперечным сечением, внутри которых расположен массив столбиков с детерминированным боковым

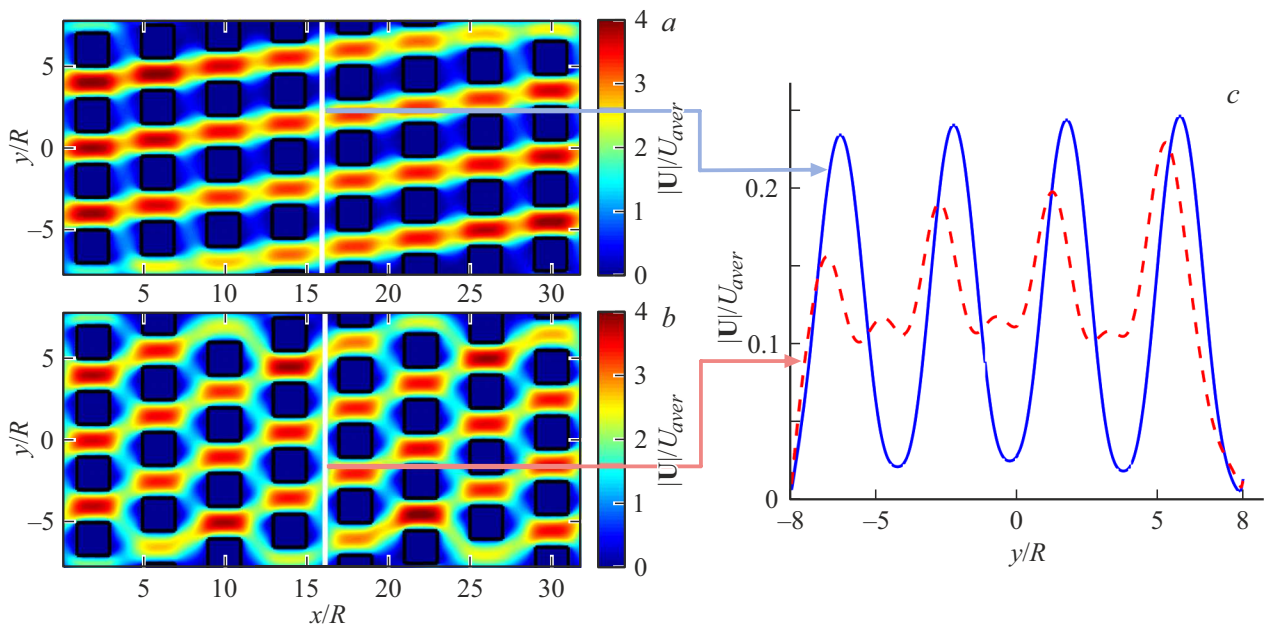


Рис. 2. Распределение модуля скорости  $|U|/U_{aver}$  при смещении ряда  $d = 5$  (a) и  $15 \mu\text{m}$  (b). c — профиль скорости между рядами.

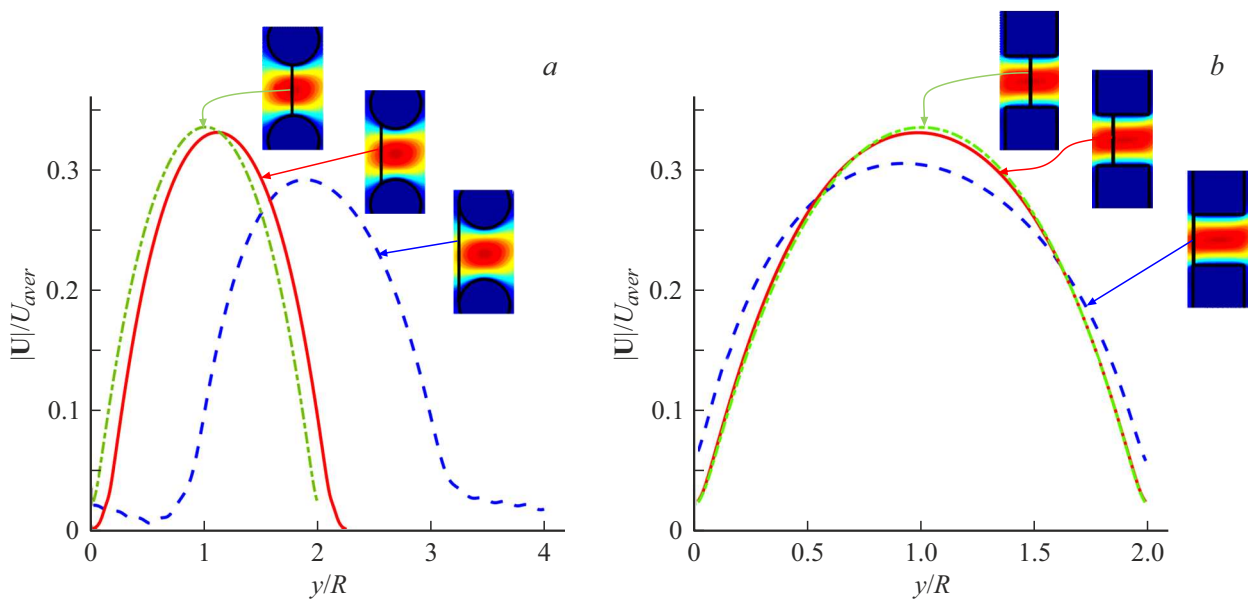


Рис. 3. Профили скорости  $|U|/U_{aver}$  в различных точках между двумя соседними столбиками круглой (a) и квадратной (b) формы.

смещением элементов (рис. 1). Варьировались форма элементов, смещение ряда  $d$  при фиксированных ширине  $W = 160 \mu\text{m}$  и высоте  $H = 20 \mu\text{m}$  канала, а также при боковом зазоре  $G_y = 20 \mu\text{m}$  между столбиками и расстоянии между рядами  $G_x = 20 \mu\text{m}$ . Длина канала  $L$  зависит от периодичности положения ряда по оси  $y$  и варьируется от  $160$  до  $320 \mu\text{m}$ . Расчеты проводились при  $Re = 0.15$ . На входе в канал задавался постоянный перепад давления  $\Delta p$  на длине фрагмента  $L$ .

На рис. 2, a и b показано распределение значений модуля скорости  $|U|$ , нормированных в каждой расчет-

ной точке области путем деления на среднюю скорость в поперечном сечении (плоскость  $yOz$ ) между рядами элементов ( $U_{aver}$ ), в каналах с квадратными столбиками для различных смещений ряда:  $d = 5$  и  $15 \mu\text{m}$ . Можно заметить, что смещение ряда оказывает заметное воздействие на поле скорости в каналах. Профиль скорости вдоль оси  $y$  между рядами препятствий неравномерный и существенно зависит от величины смещения (рис. 2, c). Для микроканала со смещением  $d = 5 \mu\text{m}$  характерен синусоидальный профиль скорости с высокой амплитудой, в то время как для смещения  $d = 15 \mu\text{m}$  амплитуда

колебаний скорости значительно меньше. В среднем разница между максимальной и минимальной скоростью составляет 90% для меньшего смещения и 48% для большего смещения. Микроканал с большим градиентом скорости (со смещением ряда  $d = 5 \mu\text{m}$ ) может сильно влиять на поведение деформируемых частиц или клеток, где увеличивается вероятность их вращения, деформирования, что впоследствии приводит к существенному изменению траектории. Исследование поля скорости в зазорах между элементами конструкции DLD представляет собой ключевой аспект для практического применения.

На рис. 3 показаны профили скоростей, образованные между парой соседних элементов круглой и квадратной формы. Можно заметить, что скорость течения между столбиками формирует параболический профиль. Сравнение показывает, что более высокий градиент скорости наблюдается между круглыми столбиками. В частности, поток через такие формы демонстрирует изменение градиента скорости на 15% от начала до середины зазора. Для квадратной формы структур это изменение составляет приблизительно 9%. Таким образом, неоднородность поля скорости между столбиками может существенно влиять на деформацию мягких частиц или клеток, что является важным фактором при разработке микрофлюидных устройств, использующих технологию DLD.

В ходе работы были исследованы характеристики потока вязкой несжимаемой жидкости в микроканале с детерминированным боковым смещением элементов различной формы и расположения. Результаты показали, что вариации в смещении рядов значительно влияют на распределение скорости в канале и профиль скорости между рядами. При величине смещения  $d = 5 \mu\text{m}$  разница между максимальной и минимальной скоростью составляет 90%, а при  $d = 15 \mu\text{m}$  этот показатель существенно меньше и составляет 48%. Для эффективной сортировки некруглых или деформируемых частиц предпочтительнее использовать микроканалы с большим смещением ряда  $d$ , так как это обеспечивает более стабильное распределение скорости между рядами. Показано, что форма элементов в системе с DLD играет важную роль в процессе сортировки, особенно при работе с мягкими клетками. Сравнение профилей скоростей между парой соседних элементов разной формы показало, что при круглых столбиках изменение градиента скорости от начала до середины зазора составляет 15%, в то время как для квадратных столбиков оно составляет около 9%. Таким образом, результаты моделирования подчеркивают важность тщательного выбора геометрии элементов и их пространственного распределения при проектировании микроканалов с технологией DLD. Оптимизация формы и расположения элементов может значительно улучшить эффективность сортировки и манипуляции деформируемыми частицами, что особенно актуально для биомедицинских исследований. Так, например, более высокий градиент скорости может

быть использован для улучшения сепарации твердых сферических частиц, в то время как более низкий градиент скорости предотвратит чрезмерную деформацию и повреждение мягких биологических образцов. Поэтому глубокое понимание влияния геометрии на процесс сортировки открывает новые возможности для разработки инновационных микрофлюидных устройств.

### Финансирование работы

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 24-19-00697 (<https://rscf.ru/project/24-19-00697/>).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] A.P. Iakovlev, A.S. Erofeev, P.V. Gorelkin, *Biosensors*, **12** (11), 956 (2022). DOI: 10.3390/bios12110956
- [2] O.G. Chavez-Pineda, R. Rodriguez-Moncayo, D.F. Cedillo-Alcantar, P.E. Guevara-Pantoja, J.U. Amador-Hernandez, J.L. Garcia-Cordero, *Electrophoresis*, **43** (16-17), 1667 (2022). DOI: 10.1002/elps.202200067
- [3] A. Wang, A. Abdulla, X. Ding, *Proc. Instit. Mech. Eng. H*, **233** (7), 683 (2019). DOI: 10.1177/095441191985
- [4] M. Sivaramakrishnan, R. Kothandan, D.K. Govindarajan, Y. Meganathan, K. Kandaswamy, *Curr. Opin. Biomed. Eng.*, **13**, 60 (2020). DOI: 10.1016/j.cobme.2019.09.014
- [5] J. Zhou, P. Mukherjee, H. Gao, Q. Luan, I. Papautsky, *APL Bioeng.*, **3** (4), 041504 (2019). DOI: 10.1063/1.5120501
- [6] A. Hochstetter, R. Vernekar, R.H. Austin, H. Becker, J.P. Beech, D.A. Fedosov, D.W. Inglis, *ACS Nano*, **14** (9), 10784 (2020). DOI: 10.1021/acsnano.0c05186
- [7] A. Zhanov, Y.S. Lee, S. Yang, *Micro and Nano Syst. Lett.*, **11** (1), 11 (2023). DOI: 10.1186/s40486-023-00175-w
- [8] Y.A. Pityuk, O.A. Abramova, N.B. Fatkullina, A.Z. Bulatova, in *Recent research in control engineering and decision making*, ed. by O. Dolinina, A. Brovko, V. Pechenkin, A. Lvov, V. Zhmud, V. Kreinovich. Ser. Studies in Systems Decision and Control (Springer, Cham, 2019), vol. 199, p. 338–352. DOI: 10.1007/978-3-030-12072-6\_28
- [9] O.A. Abramova, Y.A. Pityuk, N.A. Gumerov, I.S. Akhatov, in *Supercomputing: 4th Russian supercomputing days*, ed. by V. Voevodin, S. Sobolev (Springer, Cham, 2018), vol. 965, p. 427–438. DOI: 10.1007/978-3-030-05807-4\_36
- [10] O.A. Солнышкина, Н.Б. Фаткуллина, А.З. Булатова, *Сиб. журн. индустр. матем.*, **26** (2), 130 (2023). DOI: 10.33048/SIBJIM.2023.26.211 [O.A. Solnyshkina, N.B. Fatkullina, A.Z. Bulatova, *J. Appl. Ind. Math.*, **17** (2), 396 (2023). DOI: 10.1134/S1990478923020175].